

# ВЗАИМОСВЯЗЬ ЛОКАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ С РАМАН ЧАСТОТАМИ I-I, I-SI СВЯЗЕЙ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСАХ

Булатова Л.М., Барташевич Е.В., Юшина И.Д.

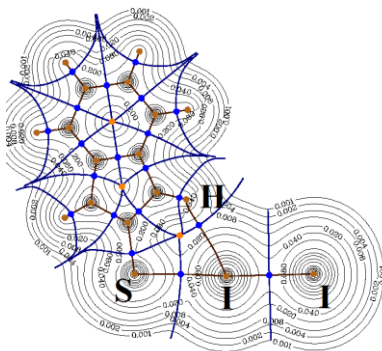
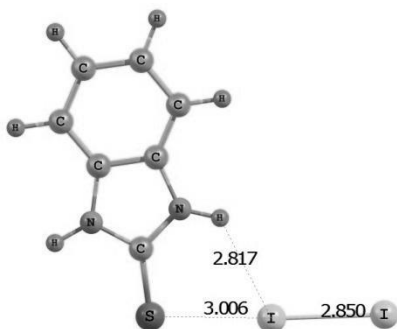
Южно-Уральский государственный университет

454080, г. Челябинск, пр. Ленина, д. 76

В данной работе представлены результаты квантово-химических расчетов РАМАН активных частот для связей I-I и I-SI в молекулярных комплексах с тиосодержащими гетероциклами.

Для локализации равновесной геометрии комплексов посредством квантово-химических расчетов, использовали метод B3LYP/6-311\*\*. Расчеты выполнены с помощью пакета программ Firefly version 8.0.1, на суперкомпьютерном кластере Торнадо (ЮУрГУ). На основе квантово топологического анализа электронной плотности (ЭП) (QTAIM) были вычислены и проанализированы локальные свойства в критических точках ЭП (3,-1) для связей I-I, I-SI.

В шести рассмотренных комплексах, для которых известны спектроскопические экспериментальные данные, наблюдаются критические точки электронной плотности, отвечающие межмолекулярным взаимодействиям S...I, I...H. Связи S...I называются галогенными связями и, очевидно, оказывают влияние на смещение колебаний в молекуле дигалогенида.



Высокие коэффициенты линейной корреляции (выше 95 %) между расчетными частотами колебаний I-I и I-SI связей в данном ряду обнаруживаются для следующих локальных характеристик: детерминанта гессиана ЭП, плотности потенциальной энергии, Лапласиана ЭП, плотности усредненной локальной энергии ионизации, полного молекулярного электростатического потенциала.

Сравнение расчетных частот с экспериментальными данными показало, что для I-I связи они отклоняются меньше чем на  $10\text{ см}^{-1}$ , а I-CL систематически завышены на  $54\text{ см}^{-1}$ . Расчетные частоты связей S...I лежат в диапазоне от  $211$  до  $273\text{ см}^{-1}$ .

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования РФ (грант 2014 г.)*

## ТИАЗОЛСОДЕРЖАЩИЕ АМИДЫ ДИФЕНИЛАМИН-2-КАРБОНОВЫХ И АКРИДОНУКСУСНЫХ КИСЛОТ

*Кудрявцева Т.Н., Бушина Л.Г., Богатырев К.В., Брахнова Е.Ю.*

Курский государственный университет

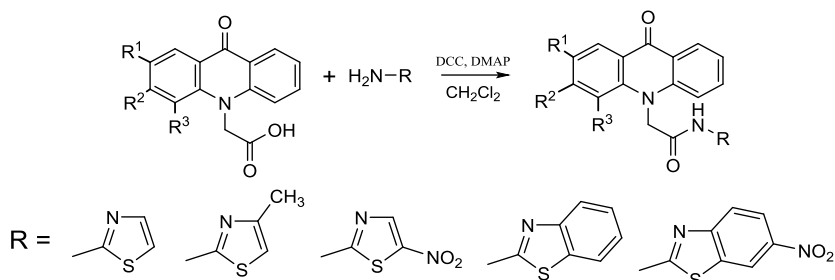
305000, г. Курск, ул. Радищева, д. 33

Курский государственный медицинский университет

305041, г. Курск, ул. К. Маркса, д. 3

Дифениламин-2-карбоновые кислоты, являющиеся исходными соединениями в синтезе акридонов, обладают ценными фармакологическими свойствами, некоторые из них применяются в медицинской практике в качестве нестероидных анальгетиков [1]. Производные акридонуксусной кислоты также активно используются в медицине [2]. Фрагмент 2-аминотиазола входит в структуру ряда лекарственных и биологически активных веществ [1].

Поэтому с целью поиска новых биологически активных производных в указанных выше рядах соединений синтезирована серия гетарилзамещенных карбоксамидов – производных акридонуксусных кислот:



$\text{R}^1=\text{H}, \text{R}^2=\text{H}, \text{R}^3=\text{H}$  ;  $\text{R}^1=\text{CH}_3, \text{R}^2=\text{H}, \text{R}^3=\text{H}$  ;  $\text{R}^1=\text{H}, \text{R}^2=\text{H}, \text{R}^3=\text{CH}_3$  ;  
 $\text{R}^1=\text{OCH}_3, \text{R}^2=\text{H}, \text{R}^3=\text{H}$  ;  $\text{R}^1=\text{H}, \text{R}^2=\text{OCH}_3, \text{R}^3=\text{H}$  ;  $\text{R}^1=\text{H}, \text{R}^2=\text{NO}_2, \text{R}^3=\text{H}$ .

и дифениламин-2-карбоновых кислот: